

БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по учебной работе

Белорусского государственного университета

А.Л. Толстик

2014 г.

Регистрационный № УД- 1131 /баз.



МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

**Учебная программа учреждения высшего образования
по учебной дисциплине для специальностей:**

<u>1-31 05 01</u>	<u>Химия (по направлениям специальности</u>
<u>1-31 05 01-01</u>	<u>Научно-производственная деятельность,</u>
<u>1-31 05 01-04</u>	<u>Охрана окружающей среды).</u>
<u>1-31 05 03</u>	<u>Химия высоких энергий,</u>
<u>1-31 05 04</u>	<u>Фундаментальная химия</u>

2014 г.

СОСТАВИТЕЛИ:

Н. С. Коваленко – профессор кафедры общей математики и информатики Белорусского государственного университета, доктор физико-математических наук, профессор;

Н. А. Дегтяренко – доцент кафедры общей математики и информатики Белорусского государственного университета, кандидат физико-математических наук, доцент;

Л. А. Шмат – старший преподаватель кафедры общей математики и информатики Белорусского государственного университета

РЕЦЕНЗЕНТЫ:

Кафедра высшей математики Учреждения образования «Белорусский государственный технологический университет»;

В. В. Цегельник – заведующий кафедрой высшей математики Учреждения образования «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники», доктор физико-математических наук, профессор

РЕКОМЕНДОВАНА К УТВЕРЖДЕНИЮ:

Кафедрой общей математики и информатики механико-математического факультета Белорусского государственного университета

(протокол № 10 от 19.05.2014);

Научно-методическим советом Белорусского государственного университета (протокол № 6 от 20.06.2014)

Ответственный за редакцию: Н.А. Дегтяренко

Ответственный за выпуск: Н.А. Дегтяренко

1. ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

Математическое моделирование химического процесса представляет собой исследование природы и механизма химических реакций с помощью математической модели. Оно позволяет применять современный математический аппарат и вычислительную технику. На основе математической модели может быть разработан ее компьютерный аналог путем программирования математических зависимостей модели. Численные исследования с помощью ПЭВМ обеспечивают получение результатов, которые оценивают и сопоставляют с моделируемой системой. Этапы моделирования можно представить следующим образом.

1. Формулируют цель математического моделирования изучаемого химического процесса.
2. В соответствии с целью, исходными физико-химическими законами и данными об изучаемом химическом процессе рассматривают его установленный механизм или вырабатывают статистические гипотезы о механизме исследуемого процесса. Этот этап реализует принцип физико-химической обоснованности модели.
3. Строят совокупность математических объектов, соответствующих механизму исследуемого химического процесса. Эти объекты образуют математическую модель.
4. Подбирают подходящий метод решения полученной математической задачи и реализуют его с помощью компьютерного моделирования.
5. Проводят анализ полученных результатов. Этот этап показывает, насколько адекватной исходным данным является построенная модель.

Основной целью преподавания дисциплины «Математическое моделирование химических процессов» является подготовка студентов к использованию современного математического аппарата и компьютерных программных средств в качестве эффективных инструментов для решения научных и практических задач в области химии.

Основные задачи преподавания дисциплины:

- придать общему курсу математики для студентов специальностей 1-31 05 01 «Химия (по направлениям специальности 1-31 05 01 01 научно-производственная деятельность, 1-31 05 01 04 охрана окружающей среды)», 1-31 05 03 «Химия высоких энергий», 1-31 05 04 «Фундаментальная химия» профессиональную направленность;
- сформировать у студентов представление о математическом аппарате современной химии;
- привить студентам первичные навыки построения математических моделей химических процессов и реализации этих моделей с помощью современных методик использования компьютера.

С учетом сформулированных задач построение программы дисциплины «Математическое моделирование химических процессов» основывается на трех **основных принципах**:

- интеграционный или междисциплинарный подход;
- применение компьютерных технологий;
- усиление роли самостоятельной работы студентов в процессе освоения учебного материала.

Структура содержания учебного материала

Содержание учебного материала структурно представлено тремя основными блоками. В первом блоке дается краткий обзор современных программных средств, которые могут быть использованы для реализации математического моделирования на компьютере. Здесь же подробнее рассматриваются универсальная техническая компьютерная система Mathematica, разработанная американской компанией Wolfram Research Inc., и табличный процессор Microsoft Excel – составляющий стандартного пакета Microsoft Office. Аргументируем выбор именно этих двух программных средств (далее в тексте для краткости будем использовать соответствующие термины Mathematica и Excel) для реализации задач данного курса.

Универсальная техническая компьютерная система Mathematica является одним из наиболее распространенных в мире программных средств, которое позволяет весьма эффективно выполнять как численные, так и символьные вычисления, имеет развитую двумерную и трехмерную графику и встроенный язык программирования высокого уровня. Указанные возможности этого пакета и удобный пользовательский интерфейс обеспечили ему широкое применение во многих областях современного естествознания и в учебном процессе. Mathematica позволяет переложить многие громоздкие и трудоемкие аналитические преобразования и вычисления на компьютер и сосредоточиться на проблеме постановки задачи и анализе результатов ее решения. К ее достоинствам также можно отнести обширные графические возможности и специальные приложения.

Табличный процессор Excel в общих чертах изучался студентами на первом курсе в рамках учебной дисциплины «Основы информационных технологий». Здесь он рассматривается в качестве универсального пакета, позволяющего применять основные методы математической статистики. Возможностей этого процессора вполне достаточно, чтобы решать статистические задачи, предлагаемые на практических занятиях студентам второго года обучения, кроме того, его использование при решении задач позволяет применить, закрепить и расширить знания, полученные студентами на первом курсе. В Excel существуют как возможности самостоятельного оформления пользователем решения задачи, включающего программирование формул, построение графиков, гистограмм, написание макросов и т. д., так и возможности использования встроенных подпрограмм.

При использовании студентами различных программных средств особое внимание следует уделить процессу подготовки данных и их вводу в ту или

иную программу (возможно, с преобразованием формата данных), а также этапу анализа полученных результатов. Важно не только уметь правильно математически моделировать химическую задачу, но и грамотно истолковывать тот объем информации, который практически без усилий получается в результате работы программы. Необходимо подчеркнуть, что умелая подготовка данных к вводу в программу имеет своей целью автоматизировать как можно большее количество самых различных рутинных операций при проведении исследований.

Второй блок образован рядом математических моделей задач химического содержания, для реализации которых на ПЭВМ используется универсальная техническая компьютерная система Mathematica. Эти модели сгруппированы по следующим темам: «Методы линейной алгебры в применении к решению задач химического содержания», «Элементы исследования функции одной переменной в задачах химического содержания», «Химические равновесия, описываемые нелинейными уравнениями», «Аналитическое и численное интегрирование в ряде задач химического содержания», «Аналитическое и численное решение дифференциальных уравнений и их систем в ряде задач химического содержания».

Третий блок образован рядом статистических моделей задач химического содержания, для реализации которых на ПЭВМ используется табличный процессор Excel. Одним из важнейших моментов в деятельности специалиста в области химии, экологии, охраны окружающей среды является принятие решений в условиях неопределенности. При этом наиболее разработанным инструментарием является математическая статистика, позволяющая решать задачи в условиях вероятностной неопределенности и имеющая достаточно распространенное программное обеспечение. Статистические модели сгруппированы в третьем блоке по следующим темам: «Метод наименьших квадратов. Метод выравнивания», «Первоначальная статистическая обработка экспериментальных данных», «Числовые характеристики выборки. Статистические оценки параметров распределения», «Проверка статистических гипотез», «Корреляция и регрессия».

Знания и умения как результаты изучения дисциплины

В результате изучения дисциплины необходимо *знать*:

- роль математических методов в современной химии;
- основные этапы математического моделирования химического процесса;
- названия, назначение, основные характеристики прикладных математических и статистических программных средств, предусмотренных данной программой;
- основные возможности универсальной технической компьютерной системы Mathematica и табличного процессора Excel, позволяющие реализовывать на компьютере математическое моделирование задач химического содержания;

- детерминированные модели химических процессов, предусмотренные данной программой;
- вероятностно-статистические модели химических процессов, предусмотренные данной программой.

В результате изучения дисциплины необходимо *уметь*:

- формулировать цель математического моделирования изучаемого химического процесса;
- строить детерминированную или вероятностно-статистическую модель исследуемого химического процесса с учетом принципа физико-химической обоснованности модели;
- выбирать подходящий метод решения полученной математической задачи и ориентироваться в возможностях его реализации с помощью современных методик использования компьютера;
- реализовывать компьютерное моделирование учебных задач с помощью универсальной технической компьютерной системы Mathematica и табличного процессора Excel;
- обеспечивать рациональный импорт исходных данных в выбранную компьютерную программу и грамотный анализ полученных результатов на предмет адекватности построенной модели исходным данным задачи;
- при помощи информационных технологий находить дополнительную информацию о методах математического моделирования и о применении программного обеспечения для решения математических моделей.

В результате изучения дисциплины необходимо *владеть*:

- математическим аппаратом матричного исчисления и линейной алгебры для решения задач о составе сложных смесей и прямой задачи химической кинетики, методами решения алгебраических уравнений и их систем;
- навыками построения и анализа графиков функциональных зависимостей на плоскости и в пространстве при помощи компьютерных средств;
- приложениями математического анализа в химии;
- приложениями численных методов в задачах химического содержания;
- приложениями дифференциальных уравнений и их систем в задачах химической кинетики;
- вероятностно-статистическими методами математической обработки и анализа результатов химического эксперимента.

Организация процесса обучения студентов предполагает аудиторную форму работы (лекции, лабораторные занятия в компьютерных классах, кон-

сультации) и самостоятельную работу студентов, в том числе КСР/УСР. При чтении лекционного курса и проведении лабораторных занятий рекомендуется использование междисциплинарного подхода, при чтении лекционного курса предполагается применение технических средств обучения для демонстрации приемов работы с программными средствами.

Для организации самостоятельной работы студентов предполагается размещение в сетевом доступе комплекса учебных и учебно-методических материалов (программа, краткий лекционный курс, задания к лабораторным работам и методические указания и рекомендации по их выполнению, список рекомендуемой литературы и информационных ресурсов, список вопросов к зачету, справочный материал).

Учебным планом по специальности 1-31 05 01 «Химия (по направлениям специальности 1-31 05 01 01 научно-производственная деятельность, 1-31 05 01 04 охрана окружающей среды)» на изучение учебной дисциплины «Математическое моделирование химических процессов» предусмотрено 50 часов, в том числе – 34 часа аудиторных занятий: лекции – 10 часов, лабораторные занятия (в компьютерных классах) – 18 часов, КСР/УСР – 6 часов.

Учебным планом по специальностям 1-31 05 03 «Химия высоких энергий», 1-31 05 04 «Фундаментальная химия» на изучение учебной дисциплины «Математическое моделирование химических процессов» предусмотрено 70 часов, в том числе – 44 часа аудиторных занятий: лекции – 12 часов, лабораторные занятия (в компьютерных классах) – 26 часов, КСР/УСР – 6 часов. По итогам изучения учебной дисциплины для всех перечисленных выше специальностей предусмотрен зачет.

2. ПРИМЕРНЫЙ ТЕМАТИЧЕСКИЙ ПЛАН

В приведенном ниже примерном тематическом плане количество часов по специальностям 1-31 05 03 «Химия высоких энергий», 1-31 05 04 «Фундаментальная химия» приводится без скобок. Количество часов по специальности 1-31 05 01 «Химия (по направлениям специальности 1-31 05 01 01 научно-производственная деятельность, 1-31 05 01 04 охрана окружающей среды)» приводится в скобках.

№ п/п	Названия раздела, темы	Количество часов			
		Лекции	Лабораторные занятия	КСР/УСР	Самостоятельная работа
1	2	3	4	5	6
1	Раздел I. Программное обеспечение математического моделирования химических процессов	3(3)			8(6)
1.1	Тема 1.1. Предмет и задачи курса, организационные формы работы. Краткий обзор современных программных средств, которые могут быть использованы при реализации математического моделирования на компьютере	1(1)			
1.2	Тема 1.2. Табличный процессор Excel (рекомендации по работе со справочным материалом)	1(1)			4(3)
1.3	Тема 1.3. Универсальная техническая компьютерная система Mathematica (рекомендации по работе со справочным материалом)	1(1)			4(3)
2	Раздел II. Детерминированные модели химических процессов		16(10)	3(3)	10(6)
2.1	Тема 2.1. Методы линейной алгебры в применении к решению задач химического содержания		3(2)	1(1)	2(1)
2.2	Тема 2.2. Элементы исследования функции одной переменной в задачах химического содержания		3(2)		2(1)
2.3	Тема 2.3. Химические равновесия, описываемые нелинейными уравнениями		3(2)	1(1)	2(1)
2.4	Тема 2.4. Аналитическое и численное интегрирование в ряде задач химического содержания		3(2)		2(1)
2.5	Тема 2.5. Аналитическое и численное решение дифференциальных уравнений и их систем в ряде задач химического содержания		4(2)	1(1)	2(2)
3	Раздел III. Вероятностно-статистические модели химических процессов	9(7)	10(8)	3(3)	8(4)
3.1	Тема 3.1. Статистические модели задач химического содержания по теме «Метод наименьших квадратов. Метод выравнивания»	2(1)	2(2)	1(1)	2(1)
3.2	Тема 3.2. Первоначальная статистическая обработка количественных данных, полученных в химических экспериментах. Числовые характеристики выборки. Статистические оценки параметров распределения.	3(2)	3(2)		2(1)
3.3	Тема 3.3. Проверка параметрических и непараметрических статистических гипотез в задачах химического содержания	2(2)	3(2)	1(1)	2(1)
3.4	Тема 3.4. Статистические модели задач химического содержания по теме «Корреляция и регрессия»	2(2)	2(2)	1(1)	2(1)
Всего		12(10)	26(18)	6(6)	26(16)

3. СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОГО МАТЕРИАЛА

РАЗДЕЛ I. Программное обеспечение математического моделирования химических процессов

Тема 1.1. Предмет и задачи курса, организационные формы работы. Краткий обзор современных программных средств, которые могут быть использованы при реализации математического моделирования на компьютере

Предмет и задачи курса, организационные формы работы. Краткий обзор современных программных средств, которые могут быть использованы при реализации математического моделирования на компьютере: прикладных математических пакетов (Mathcad, MATLAB, Mathematica), статистических пакетов (STATISTICA, STADIA). Интеллектуальный анализ данных, специальные приложения в прикладной химии, молекулярной генетике и геной инженерии, медицине.

Тема 1.2. Табличный процессор Excel (рекомендации по работе со справочным материалом)

Табличный процессор Excel: структура книги Excel; построение таблиц и графиков функций; работа с формулами; встроенные функции Excel; встроенные в Пакет анализа подпрограммы; создание и выполнение макросов.

Тема 1.3. Универсальная техническая компьютерная система Mathematica (рекомендации по работе со справочным материалом)

Универсальная техническая компьютерная система Mathematica: основные элементы пакета Mathematica; запуск пакета, работа с программой, выход; получение справочной информации от пакета Mathematica; численные расчеты; символьные вычисления; графика; элементы программирования в пакете Mathematica.

РАЗДЕЛ II. Детерминированные модели химических процессов

Тема 2.1. Методы линейной алгебры в применении к решению задач химического содержания

Расчет смесей сложного состава. Исследование состава смеси при помощи системы химических сенсоров. Классический матричный метод в применении к решению прямой кинетической задачи.

Тема 2.2. Элементы исследования функции одной переменной в задачах химического содержания

Исследование влияния щелочи, добавляемой в раствор кислоты, на pH раствора. Исследование константы скорости элементарной реакции в неизотермической кинетике (уравнение Аррениуса). Химический смысл асимптот графика функции, исследования функции при помощи первой и второй производных, построение графика функции в задачах химического содержания.

Тема 2.3. Химические равновесия, описываемые нелинейными уравнениями

Исследование рН растворов солей и слабых кислот. Задача о титровании слабой одноосновной кислоты сильным основанием.

Тема 2.4. Аналитическое и численное интегрирование в ряде задач химического содержания

Задача о концентрации раствора. Прямая задача химической кинетики: кинетика простых реакций. Простая перегонка. Процесс ионизации в газовой среде.

Тема 2.5. Аналитическое и численное решение дифференциальных уравнений и их систем в ряде задач химического содержания

Радиоактивный распад. Двухстадийные реакции, протекающие в закрытых системах (двусторонние реакции; последовательные реакции; параллельные реакции первого порядка). Простейшая автокаталитическая реакция. Кинетические модели реакций, протекающих в открытых системах (простая реакция первого порядка в реакторе идеального смешения; переходной режим в системе из нескольких проточных реакторов идеального смешения; пример кинетического моделирования с использованием кусочно-непрерывной функции).

В пунктах 2.4, 2.5 рекомендуется организовать дополнительную реферативно-самостоятельную работу студентов по темам: «Дифференцирование и интегрирование функций нескольких переменных» (например, процесс многоступенчатой экстракции; вычисление суммарной радиоактивности плоской или пространственной области), «Дифференциальные уравнения с частными производными» (например, метод конечных разностей; краевые задачи диффузионных процессов и распределения температуры; стационарные граничные задачи; моделирование динамики молекулярных систем).

РАЗДЕЛ III. Вероятностно-статистические модели химических процессов

Статистические модели задач химического содержания, для реализации которых на ПЭВМ используется табличный процессор Excel. Во всех задачах этого раздела предполагается использование в качестве исходного статистического материала эмпирических данных, полученных в ходе конкретного химического эксперимента с целью исследования некоторого признака (некоторых признаков) рассматриваемого химического процесса. Интерпретация статистических выводов предполагается в терминах химического содержания задачи. Модели сгруппированы по перечисленным ниже темам.

Тема 3.1. Статистические модели задач химического содержания по теме «Метод наименьших квадратов. Метод выравнивания»

Решение обратной задачи химической кинетики.

Тема 3.2. Первоначальная статистическая обработка количественных данных, полученных в химических экспериментах. Числовые характеристики выборки. Статистические оценки параметров распределения.

Генеральная и выборочная совокупности. Дискретное статистическое распределение выборки. Эмпирическая функция распределения выборки. Интервальное статистическое распределение выборки. Точечные и интервальные оценки числовых характеристик генеральной случайной величины. Выбраковка результатов химического анализа.

Тема 3.3. Проверка параметрических и непараметрических статистических гипотез в задачах химического содержания

Примеры проверки параметрических статистических гипотез в задачах химического содержания. Критерий согласия Пирсона для проверки непараметрических статистических гипотез.

Тема 3.4. Статистические модели задач химического содержания по теме «Корреляция и регрессия»

Корреляционные и регрессионные стохастические зависимости. Основные числовые параметры, характеризующие такие зависимости, их смысл. Линейная корреляция.

4. ИНФОРМАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

4.1. Рекомендуемая литература

Основная литература

1. Аналитическая химия. Проблемы и подходы: в 2 т. / Пер. с англ. / Под общ. ред. Р. Кельнера [и др.]. – М.: «Мир»: ООО «Издательство АСТ», 2004 – (Лучший зарубежный учебник). – Т. 1. – 608 с.
2. Вентцель, Е.С. Прикладные задачи теории вероятностей / Е.С. Вентцель, Л.А. Овчаров. – М.: Радио и связь, 1983. – 416 с.
3. Гмурман, В.Е. Теория вероятностей и математическая статистика / В.Е. Гмурман. – 8-е изд. – М.: Высшая школа, 2008. – 479 с.
4. Горелова, Г.В. Теория вероятностей и математическая статистика в примерах и задачах с применением Excel / Г.В. Горелова, И.А. Кацко. – Ростов-на-Дону: Феникс, 2005. – 480 с.
5. Гусак, А.А. Высшая математика: учебник для студентов вузов: в 2 т. / А.А. Гусак. – 7-е изд. – Минск: ТетраСистемс, 2008. – Т.2. – 448 с.
6. Коробов, В.И. Химическая кинетика: введение с Mathcad / Maple / MCS / В.И. Коробов, В.Ф. Очков. – М.: Горячая линия-телеком, 2009. – 384с.
7. Мацкевич, И.П. Высшая математика: теория вероятностей и математическая статистика / И.П. Мацкевич, Г.П. Свирид. – Минск: Вышэйшая школа, 1993. – 265 с.
8. Прокопеня, А.Н. Применение системы Mathematica к решению обыкновенных дифференциальных уравнений / А.Н. Прокопеня, А.В. Чичурин. – Минск: БГУ, 1999. – 265 с.
9. Расолько, Г.А. Использование информационных технологий в курсе вузовской математики. В 3 ч. Ч.2. Решение задач в пакетах MathCad и Mathematica: учеб.-метод. пособие / Г.А. Расолько, Ю.А. Кремень, Н.В. Бровка, Л.Г. Третьякова. – Минск: БГУ, 2010. – 320 с.

Дополнительная литература

10. Баврин, И.И. Краткий курс высшей математики для химико-биологических и медицинских специальностей / И.И. Баврин. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2011. – 328 с.
11. Гмурман, В.Е. Руководство к решению задач по теории вероятностей и математической статистике / В.Е. Гмурман. – М.: Высшая школа, 1999. – 400 с.
12. Гусак, А. А. Задачи и упражнения по высшей математике: учеб. пособие для вузов: в 2 ч. / А. А. Гусак. – Мн.: Выш. шк., 1988. – Ч.2. – 228 с.

13. Гусак, А.А. Справочное пособие к решению задач: теория вероятностей. / А.А. Гусак, Е.А. Бричикова. – Минск: ТетраСистемс, 1999. – 288 с.
14. Дегтяренко, Н.А. Математическая статистика: пособие для студентов химического факультета / Н.А. Дегтяренко, О.Г. Душкевич. – Минск: БГУ, 2008. – 141 с.
15. Жебентяев, А.И. Аналитическая химия. Химические методы анализа / А.И. Жебентяев, А.К. Жерносек, И.Е. Талуть. – ИНФРА-М, Новое знание (Минск), 2011. – 542 с.
16. Скатецкий, В.Г. Лекции по математике для студентов химических специальностей / В.Г. Скатецкий. – Минск: БГУ, 2000. – 387 с.
17. Скатецкий, В.Г. Математические методы в химии / В.Г. Скатецкий, Д.В. Свиридов, В.И. Яшкин. – Минск: ТетраСистемс, 2006. – 368 с.
18. Тутубалин, В.Н. Теория вероятностей. Краткий курс и научно-методические замечания / В.Н. Тутубалин. – М.: Изд-во Моск. ун-та, 1972. – 230 с.

Электронные источники

19. Дегтяренко, Н.А. УМК Математическое моделирование химических процессов для специальностей: 1-31 05 01 «Химия (по направлениям)», направления специализации: 1-31 05 01-01 «Химия (научно-производственная деятельность)», 1-31 05 01-02 «Химия (научно-педагогическая деятельность)» / Н.А. Дегтяренко // Учебно-методический комплекс располагается в коллекциях: Учебно-методические комплексы механико-математического факультета. [Электронный ресурс]. – 2013. – Режим доступа: <http://elib.bsu.by/handle/123456789/39876>. – Дата доступа: 04.04.2013.
20. Дегтяренко, Н.А. УМК Математическое моделирование химических процессов для специальностей: 1-31 05 01 «Химия», направление специализации: 1-31 05 01-04 «Химия (охрана окружающей среды)» / Н.А. Дегтяренко, Л.А. Шмат // Учебно-методический комплекс располагается в коллекциях: Учебно-методические комплексы механико-математического факультета. [Электронный ресурс]. – 2013. – Режим доступа: <http://elib.bsu.by/handle/123456789/39877>. – Дата доступа: 04.04.2013.
21. Система Mathematica. Опыт использования в математике и программировании [Электронный ресурс] / А. А. Кулешов, С. В. Земсков, Ю. В. Позняк. – Режим доступа: <http://www.elbook.bsu.by/>. – Дата доступа: 09.03.2014.
22. Система Mathematica. Справочное пособие [Электронный ресурс] – Режим доступа: <http://www.elbook.bsu.by/>. – Дата доступа: 09.03.2014.
23. Электронное учебное пособие по высшей математике на базе системы МАТНЕМАТИСА [Электронный ресурс] / А. А. Кулешов, С. В. Земсков, Ю. В. Позняк. – Режим доступа: <http://www.elbook.bsu.by/>. – Дата доступа: 09.03.2014.

4.2. Методические рекомендации по организации и выполнению самостоятельной работы студентов

Важным элементом в подготовке специалиста с высшим образованием является самостоятельная работа студентов с учебным материалом.

ВНЕАУДИТОРНАЯ САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

В соответствии с «Положением о самостоятельной работе студентов» (приказ МО РБ № 405 от 27.05.2013 г.) **самостоятельная работа** (СР) студентов – это вид учебной деятельности в процессе освоения образовательных программ, осуществляемой самостоятельно вне аудитории (в библиотеке, научной лаборатории, в домашних условиях и т.д.) с использованием различных средств обучения и источников информации.

Целями СР являются:

- активизация учебно-познавательной деятельности обучающихся;
- формирование у обучающихся умений и навыков самостоятельного приобретения и обобщения знаний, а также применения знаний на практике;
- саморазвитие и самосовершенствование.

В основе **планирования и организации** самостоятельной работы студентов, в том числе по учебной дисциплине «Математическое моделирование химических процессов», лежат общие принципы:

- соответствие объема самостоятельной работы реальному бюджету времени обучающегося, выделяемого на СР и управляемую СР;
- равномерность проведения СР в течение семестра;
- системность и регулярность проведения контроля СР.

К самостоятельной работе студентов можно отнести следующие **виды внеаудиторной деятельности**:

- самостоятельный подбор необходимой литературы, поиск необходимой информации в сети Интернет;
- самостоятельное изучение и конспектирование материала, проработка тем (вопросов), вынесенных на самостоятельное изучение по источникам основной и дополнительной литературы;
- подготовка к различным формам промежуточной и итоговой аттестации (отчет по лабораторной работе, контрольная работа, зачет);
- выполнение домашних заданий;
- самостоятельное выполнение заданий лабораторных работ;
- подготовка устного сообщения, тезисов доклада, презентации.

Общими **критериями оценки** результатов внеаудиторной самостоятельной работы обучающихся, в том числе по дисциплине «Математическое моделирование химических процессов», являются:

- уровень освоения учебного материала;
- уровень умения использовать теоретические знания при выполнении практических задач;
- уровень умения использовать электронные образовательные ресурсы, находить требуемую информацию, изучать ее и применять на практике;

- обоснованность и четкость изложения материала;
- оформление материала в соответствии с требованиями стандарта;
- уровень умения ориентироваться в потоке информации, выделять главное;
- уровень умения четко сформулировать проблему, предложив ее решение, критически оценить решение и его последствия;
- уровень умения определить, проанализировать альтернативные возможности, варианты действий;
- уровень умения сформулировать собственную позицию, оценку и аргументировать ее.

УПРАВЛЯЕМАЯ САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

Управляемая самостоятельная работа (УСР) – это самостоятельная работа, выполняемая по заданию и при методическом руководстве преподавателя, контролируемая им на определенном этапе обучения.

Целью УСР дополнительно к целям СР является целенаправленное обучение основным навыкам и умениям для выполнения СР.

К **организационным формам** проведения УСР по дисциплине «Математическое моделирование химических процессов» можно отнести аудиторную деятельность на лабораторных занятиях. **Видами отчетности** УСР являются: контрольные работы, отчеты по лабораторным работам, реферативные формы отчетности. Контроль УСР по дисциплине «Математическое моделирование химических процессов» проводится преподавателем и осуществляется в виде:

- экспресс-опроса на лабораторных занятиях;
- контрольных работ;
- защиты учебных заданий лабораторных работ.

Рекомендуемое распределение часов, отведенных на КСР/УСР, а также на самостоятельную работу студентов по дисциплине «Математическое моделирование химических процессов», приведено в таблице пункта 2 «Примерный тематический план» данной учебной программы.

Примерный план контрольных мероприятий по дисциплине «Математическое моделирование химических процессов»

№ п/п	Название контролирующего мероприятия	Номер учебной недели	Количество часов
1	Подготовка к контрольной работе по темам раздела «Детерминированные модели химических процессов» (УСР)	9 (8)	1
2	Контрольная работа по темам раздела «Детерминированные модели химических процессов» (КСР)	10 (9)	2
3	Подготовка к контрольной работе по темам раздела «Вероятностно-статистические модели химических процессов» (УСР)	15 (13)	1
4	Контрольная работа по темам раздела «Вероятностно-статистические модели химических процессов» (КСР)	16 (14)	2

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ВЫПОЛНЕНИЯ ЛАБОРАТОРНЫХ РАБОТ

Учебно-методические материалы для выполнения лабораторных работ предоставляются студентам в электронном виде в формате PDF. Аудиторные часы, предусмотренные учебной программой для выполнения лабораторных работ, проводятся только в компьютерных классах при помощи соответствующего программного обеспечения. Эти материалы детально проработаны, т. к. составлены с ориентацией на самостоятельную работу студентов – каждый студент получает индивидуальный вариант для выполнения лабораторной работы и работает за компьютером также индивидуально. Учебно-методический материал для выполнения каждой из лабораторных работ имеет единую структуру:

1. задания к лабораторной работе,
2. список основных команд, необходимых для выполнения лабораторной работы, с подробным описанием их действий,
3. образцы решения лекционных математических моделей и оформления отчета по лабораторной работе.

Образцы решения лекционных математических моделей и оформления отчета по лабораторной работе представляют собой цельные программные коды рассмотренных лекционных задач по соответствующей теме, снабженные необходимыми краткими комментариями. Эти материалы предоставляются студентам в формате PDF. Цельность предоставляемых программных кодов обеспечивает удобство использования образцов при индивидуальной работе студента за компьютером на лабораторном занятии.

4.3. Средства диагностики результатов учебной деятельности

Рекомендуются следующие формы диагностики компетенций.

- Устная форма: собеседования, устные экспресс-опросы
- Письменная форма: контрольные работы
- Устно-письменная форма: отчеты по лабораторным работам с их устной защитой, реферативная форма отчетности, зачет.

В процессе обучения студенты оформляют для проверки отчеты о выполнении восьми лабораторных работ, после оформления отчета проводится устная защита каждой лабораторной работы. По результатам изучения двух основных разделов дисциплины «Детерминированные модели химических процессов» и «Вероятностно-статистические модели химических процессов» предусмотрено проведение двух контрольных работ, которые выполняются каждым студентом с помощью компьютера. Студенту в течение семестра может быть предоставлена тема для реферативной работы. По итогам изучения учебной дисциплины «Математическое моделирование химических процессов» предусмотрен зачет. Задания в зачетных билетах составлены с учетом дифференцированного подхода – они включают в себя задачи и вопросы базового уровня А и более сложного уровня В. Таким образом, студент на за-

чете обладает возможностью выбора уровня заданий. В заключение в качестве примеров приведем индивидуальный вариант контрольной работы, соответствующий разделу «Детерминированные модели химических процессов» и индивидуальный вариант зачетного билета.

ИНДИВИДУАЛЬНЫЙ ВАРИАНТ КОНТРОЛЬНОЙ РАБОТЫ

1. Требуется приготовить из трех компонентов смесь, которая содержала бы три вещества в количествах 0,6; 0,7; 1 условных единиц соответственно. Сколько условных единиц каждого компонента необходимо взять, если дана матрица

$$A = \begin{pmatrix} 0,2 & 0,3 & 0,5 \\ 0,3 & 0,4 & 0,2 \\ 0,5 & 0,3 & 0,3 \end{pmatrix}$$

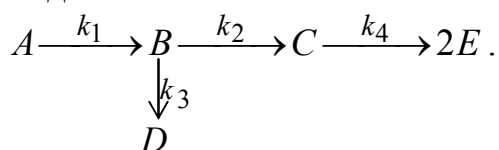
и известно, что в одной условной единице j -го компонента содержится a_{ij} условных единиц i -го вещества ($i = \overline{1,3}$; $j = \overline{1,3}$).

2. Рассмотрите прямую кинетическую задачу для случая протекания простой реакции в закрытой изотермической системе. Схема реакции имеет вид $A \xrightarrow{k} \text{Продукты}$, причем известно, что эта реакция – нулевого порядка по реагенту A . Получите аналитическое решение прямой кинетической задачи, считая, что $C_A(0) = C_{A0} \neq 0$. Установите функциональную связь между периодом полупревращения и исходной концентрацией реагента.
3. Получите функциональные зависимости текущей массы каждого участника последовательной реакции от времени, предполагая, что реакция протекает в закрытой изотермической системе в соответствии со схемой: ${}_{92}^{238}\text{U} \xrightarrow{k_1} {}_{93}^{238}\text{Np} \xrightarrow{k_2} {}_{94}^{244}\text{Pu}$. Известно, что $m_{\text{U}0} = 2 \text{ г}$; $m_{\text{Np}0} = m_{\text{Pu}0} = 0 \text{ г}$; $k_1 = 0,03 \text{ мин}^{-1}$; $k_2 = 0,0002 \text{ мин}^{-1}$. Представьте полученное аналитическое решение графически на временном промежутке от нулевого момента времени до 10 часов. Определите состав реакционной смеси через 10 часов после начала реакции.

ИНДИВИДУАЛЬНЫЙ ВАРИАНТ ЗАЧЕТНОГО БИЛЕТА

Уровень А

1. Составьте стехиометрическую матрицу для указанной кинетической модели:



Запишите вектор скоростей для

данной кинетической модели. Вычислите произведение транспонированной стехиометрической матрицы на вектор скоростей. Ответ представьте в матричной форме.

- Рассмотрите прямую кинетическую задачу для случая протекания простой реакции в закрытой изотермической системе. Схема реакции имеет вид $A \xrightarrow{k} \text{Продукты}$, причем известно, что эта реакция – третьего порядка по реагенту A . Получите аналитическое решение прямой кинетической задачи, считая, что $C_A(0) = C_{A0} \neq 0$.
- В результате проведения эксперимента получены следующие показатели:

x	0	0,6	1,3	1,8	2,7	3,1	3,9	4,2	5,1
y	10,2	8,2	6,0	5,1	1,5	0,8	-1,6	-2,8	-5,5

Постройте точечную диаграмму опытных значений. Выскажите гипотезу о виде предполагаемой функциональной зависимости между изучаемыми признаками. Найдите эту зависимость, пользуясь МНК. Сравните опытные и модельные данные и сделайте вывод о приемлемости построенной математической модели для описания экспериментальных данных.

Уровень В

- Скорость радиоллиза (скорость распада) вещества A в реакции $A \longrightarrow B$ прямо пропорциональна произведению заданной безразмерной величины – плотности излучения D – и текущей концентрации исходного реагента (коэффициент пропорциональности обозначим через $-k_0$ ($k_0 > 0$)). Аналогичную закономерность с положительным коэффициентом пропорциональности можно сформулировать и в отношении скорости образования продукта реакции. Запишите математическую модель данного химического процесса, если известно, что $D(t) = D_0 e^{-k_1 t}$ ($D_0 > 0, k_1 > 0$). Найдите аналитическое решение этой математической модели, если известно, что $C_A(0) = C_{A0} \neq 0, C_B(0) = 0$. Докажите, что скорость изменения текущей концентрации $C_A(t)$ монотонно убывает при $t > 0$. Представьте решение графически на промежутке от нулевого момента времени до одного часа при следующих значениях констант:

$$k_0 = 1/1000 \text{ с}^{-1}, k_1 = 1/1000 \text{ с}^{-1}, D_0 = 1, C_{A0} = 1 \text{ моль/л}.$$

- Дана таблица, полученная в результате статистической обработки экспериментальных данных, проведенной по паре изучаемых признаков (X, Y) :

$y \setminus x$	0,6	0,65	0,7	0,75
5	6	-	-	-
15	4	7	-	-
25	-	12	4	1
35	-	-	5	10

Выполните следующие пункты.

1. Постройте корреляционное поле.
2. Найдите эмпирическое уравнение линейной регрессии \bar{x}_y . Постройте на корреляционном поле график прямой, описываемой этим уравнением, подпишите его.
3. Вычислите следующие статистические показатели: \bar{A}_y , Θ_y , $\hat{r}_{y,x}$, $(\hat{r}_{y,x})^2$, $t_{\text{набл}}$. Разъясните их смысл.
4. Пользуясь результатами вычислений, при уровне значимости $\alpha = 0,05$ проверьте адекватность полученного уравнения линейной регрессии эмпирическим данным.